



PMT 3205

Físico-Química para Metalurgia e Materiais I

17. Calcular a variação de entalpia das seguintes reações: [80]

- a. $\text{Fe (25}^\circ\text{C)} + \frac{1}{2} \text{O}_2(25^\circ\text{C)} = \text{FeO}(25^\circ\text{C)}$
- b. $\text{Fe (25}^\circ\text{C)} + \frac{1}{2} \text{O}_2(25^\circ\text{C)} = \text{FeO}(500^\circ\text{C)}$
- c. $\text{Fe (500}^\circ\text{C)} + \frac{1}{2} \text{O}_2(300^\circ\text{C)} = \text{FeO}(1000^\circ\text{C)}$

Fe	0	6.49	3.04	7.58	-0.60	25—769	760*,910; 1392	1537	3070	326,215, 165	3 670
			11.13	—	—	769—911					
			5.80	1.98	—	911—1392					
			6.74	1.60	—	1392—1537					
"FeO"*	63 800	13.7	9.77	0.40	—	1537—2700					
			11.66	2.00	0.67	25—1377		1377	dec.		7 490
O ₂	0	49.02	7.16	1.00	0.40	25—2700	-250; -229	-219	-183	224,178	106



$$\Delta H^\circ_{\text{reação},298\text{K}} = \Delta H^\circ_{\text{FeO},298\text{K}} - \Delta H^\circ_{\text{Fe},298\text{K}} - \Delta H^\circ_{\text{O}_2,298\text{K}} = -63.800 \text{ cal/mol}$$



1. $\Delta H_a = 0$ (estão na temperatura de referência)

2. $\Delta H_b = \Delta H^\circ_{\text{reação},298\text{K}} = \Delta H^\circ_{\text{FeO},298\text{K}} - \Delta H^\circ_{\text{Fe},298\text{K}} - \Delta H^\circ_{\text{O}_2,298\text{K}} = -63.800 \text{ cal/mol}$

3. $\Delta H_c = \Delta H_{\text{aquec,FeO},298\text{K}-773\text{K}} = 47000/4,18 = 11.483 \text{ cal/mol}$ ($H_T - H_{298}$)

$$\Delta H_{\text{reação}} = \Delta H_a + \Delta H_b + \Delta H_c = 0 + (-63.000) + 11.483 = -52.317 \text{ cal/mol}$$

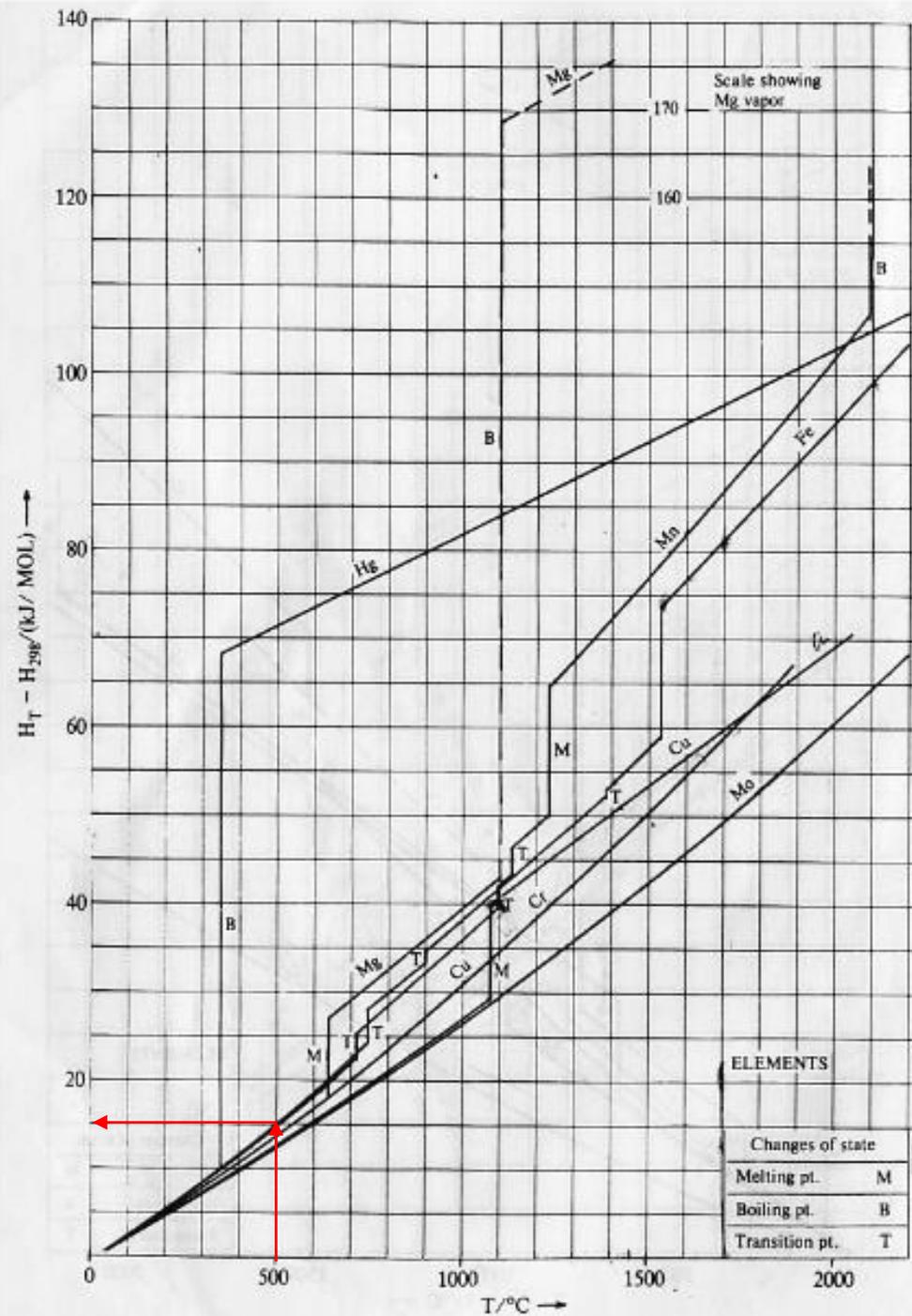
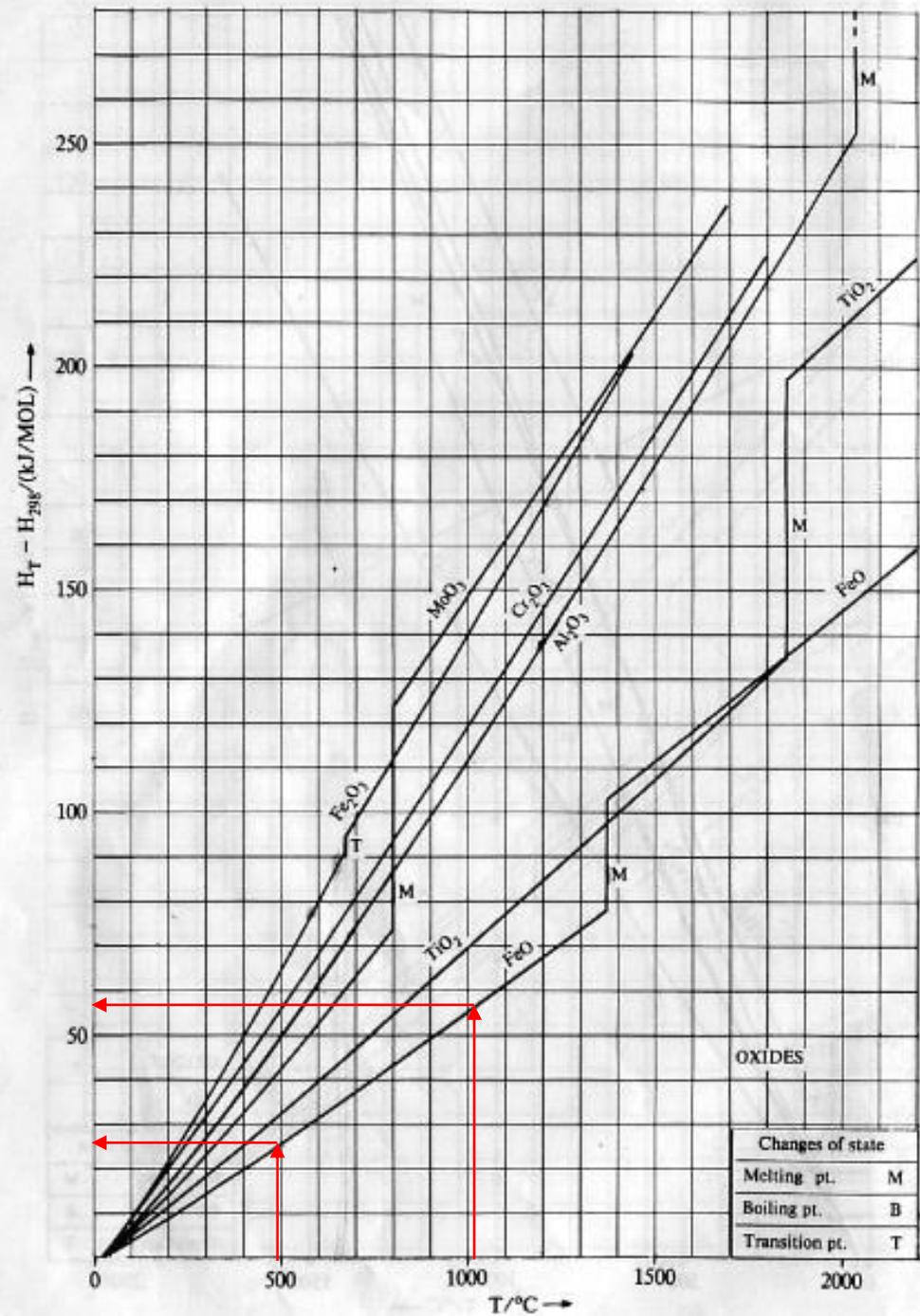


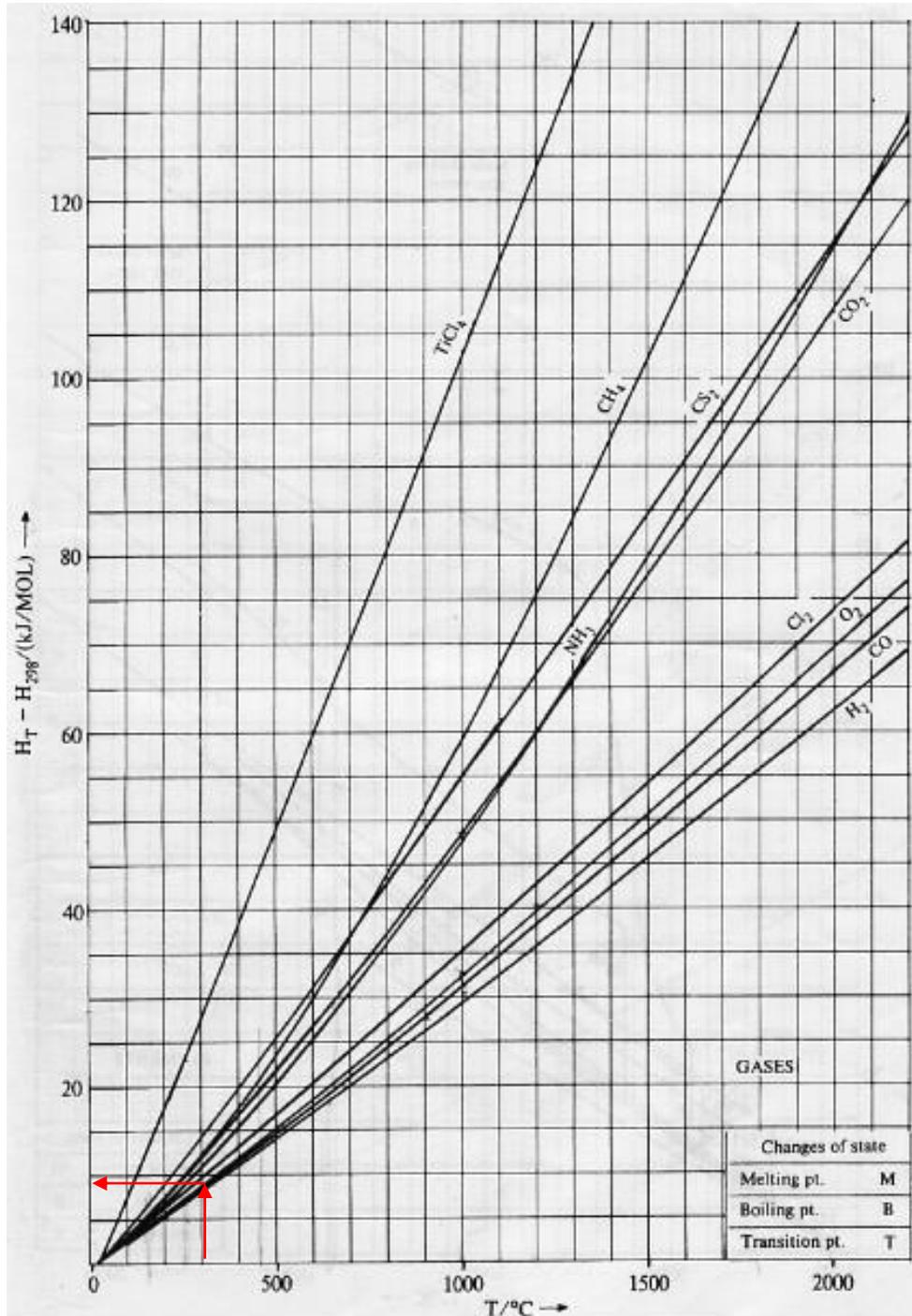
1. $\Delta H_a = \Delta H_{\text{resf,Fe},773\text{K}-298\text{K}} + \Delta H_{\text{resf,O}_2,773\text{K}-298\text{K}} = (-15.000 - 0,5 \times 9.000)/4,18 = -4.665 \text{ cal/mol}$

2. $\Delta H_b = \Delta H^\circ_{\text{reação},298\text{K}} = \Delta H^\circ_{\text{FeO},298\text{K}} - \Delta H^\circ_{\text{Fe},298\text{K}} - \Delta H^\circ_{\text{O}_2,298\text{K}} = -63.800 \text{ cal/mol}$

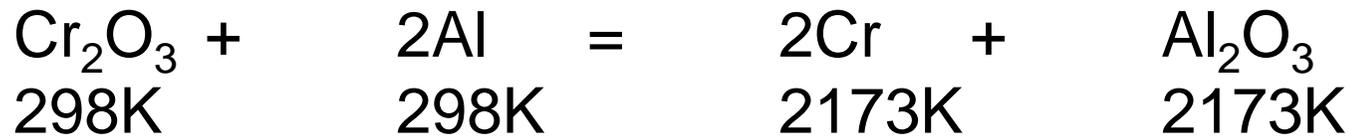
3. $\Delta H_c = \Delta H_{\text{aquecimento,FeO},298\text{K}-1273\text{K}} = 52.500/4,18 = 12.560 \text{ cal/mol}$

$$\Delta H_{\text{reação}} = \Delta H_a + \Delta H_b + \Delta H_c = -4.665 + (-63.000) + 12.560 = -55.905 \text{ cal/mol}$$





19. Cr_2O_3 puro reage com uma quantidade estequiométrica de Al, ambos inicialmente a 25°C , produzindo alumina e cromo puro. Se a máxima temperatura obtida no cadinho foi de 1900°C , calcular o calor perdido para o meio por kg de Al. [22]



$$\Delta H_{\text{reação},298\text{K}} = -1,28 \times 10^5 \text{ cal/mol}$$

$$\Delta H_{\text{aquecimento},\text{Al}_2\text{O}_3} = (-3,45 \times 10^5 + 4,00 \times 10^5) \text{ cal/mol}$$

$$\Delta H_{\text{aquecimento},\text{Cr}} = 2 \times 1,70 \times 10^4 \text{ cal/mol}$$

$$\Delta H_{\text{reação}} = -1,28 \times 10^5 + (-3,45 \times 10^5 + 4,00 \times 10^5) + 2 \times 1,70 \times 10^4 = -38.600 \text{ cal/mol}$$

$$\Delta H_{\text{reação}} = -38600 \times 1000 / (2 \times 27) = -714.814,82 \text{ cal/kg Al}$$

Quando uma reação química ou um processo qualquer ocorre em condições adiabáticas, considera-se que toda energia (gerada ou absorvida) é transferida para os produtos. A temperatura atingida por eles é chamada de:

TEMPERATURA TEÓRICA OU ADIABÁTICA DE REAÇÃO

- Quando os produtos são gasosos: **TEMPERATURA TEÓRICA DE CHAMA**



$$\Delta H_{\text{reação}} = 0$$

Termodinâmica – Balanço térmico

Temperatura teórica de chama (K)

Fuel	Oxigénio como oxidante	Ar como oxidante
Hidrogénio, H_2	3079	2384
Metano, CH_4	3054	2227
Propano, C_3H_8	3095	2268
Octano, C_8H_{18}	3108	2277

Termodinâmica – Balanço térmico

- Calcular a temperatura teórica de chama da queima do CO a 25°C com O₂ puro a 25°C. Compare com a TTC da queima com ar a 25°C [23]



$$\Delta H_{\text{reação},298\text{K}} = -2,83 \times 10^5 \text{J} = -6,77 \times 10^4 \text{cal}$$

$$\Delta H_{\text{aquecimento},\text{CO}_2,298\text{-TTC}} = 6,77 \times 10^4 \text{cal} =$$

$$= 10,55 \times (\text{TTC} - 298) + 0,00216 \times 0,5 \times (\text{TTC}^2 - 298^2) + 204000 \times (1/\text{TTC} - 1/298)$$

$$\text{TTC} = 4640\text{K}$$



$$\Delta H_{\text{reação},298\text{K}} = -2,83 \times 10^5 \text{J} = -6,77 \times 10^4 \text{cal}$$

$$\Delta H_{\text{aquecimento},\text{CO}_2+\text{N}_2,298\text{-TTC}} = 2,83 \times 10^5 \text{J}$$

$$\text{TTC} = 2600\text{K}$$